

LC-OCD Analyse einer Wasserprobe

Auftr.# Kunde / DOC-Labor: / humintech_1 (A6217)
Kontakt: Berthold Stern <b.stern@humintech.com>
Anzahl Std: / UPW: 1 / 0
Messbedingungen: LC-OCD System: 015, Säule: 50720 , Eluent: Std. x 1, Fluss: 1,0 mL/min
Datum Probenahme:
Datum Probeneingang: 21 MRZ 2018
Datum Messung: 21 MRZ 2018 **Datenauswertung:** B.Sc. F. Hamperl
Datum Berichterstellung: 22 MRZ 2018 **Berichterstellung:** Dr. S. Huber

Rechtlicher Hinweis: Wir garantieren die Gültigkeit der im Bericht wiedergegebenen Analysendaten nach Stand von Wissenschaft und Technik. Für die im Bericht wiedergegebenen Interpretationen und Empfehlungen, die über die Erstellung der Daten hinausgehen, können wir keinerlei Haftung übernehmen. Alle Aussagen gehen zudem davon aus, dass repräsentative Proben eingeschickt wurden, die einem „typischen Betriebszustand“ entsprechen.

Technische Hinweise (siehe auch unsere Homepage): Alle angegebenen Werte entsprechen der Masse an organisch-gebundenem Kohlenstoff (OC) in µg/L oder ppb, oder, sofern angegeben, mg/L (ppm). Die Molekülmassen liegen bei natürlichem organischen Material etwa um den Faktor 2 darüber (C = 50 Gew.-%). Für Säuren liegt der Faktor jedoch höher (3-4), für hydrophoben OC (HOC) niedriger (1-2). Die angegebenen Molmassen (Molekulargewichte) für die Huminstoff-Fraktion beziehen sich jedoch auf das gesamte Molekül. Neben Chromatogrammen für OC (OCD) werden auch die UV-Absorption bei 254 nm (UVD) und der org. geb. Stickstoff (OND) erfasst. Die Säure-Fraktion enthält Anteile an niedermolekularen Fulvinsäuren. Dieser Anteil wird über einen Algorithmus herausgerechnet. Daher können die Chromatogramme einen „Säurepeak“ aufweisen, obwohl niedermolekulare Säuren nicht vorhanden sind.

SUMMARISCHE PARAMETER:

DOC (Dissolved OC): Wird im „Bypass“ der chromatographischen Säule summarisch bestimmt. Zuvor passiert die Probe ein 0,45 µm In-line-Membranfilter.

HOC (Hydrophobic OC): Errechnet aus DOC minus CDOC. Der CDOC ist das Gesamtintegral des Chromatogramms. Alle Stoffe, die auf der Säule „hängenbleiben“, werden demnach als HOC definiert. Hierzu zählen bei Oberflächenwässern Kohlenwasserstoffe, bei Grundwässern im Wesentlichen „Humine“ (unlösliche Huminstoffe).

CDOC (Chromatographic DOC): Gesamtintegral des Chromatogramms, auch „hydrophiler DOC“ bezeichnet (siehe nachfolgend):

ROM = Refractory Organic Matter:

Humics (HS): „Enge“ Definition auf Basis von Retentionszeit, Peakbreite, UV-Absorption und Molmassen. Kalibrierung auf Basis von „Suwannee River“ Standard FA und HA (IHSS, International Humic Substances Society). Neben Quantifizierung werden auch statistische Daten wie Molmassenverteilung (M_n) und Aromatizität (SAK/OC) berechnet.

Building Blocks (BB): Die HS-Fraktion wird von Schultern überlagert, deren Form, Konzentration und UV-Aktivität stark variieren können. Es handelt sich hier i. d. R. um Grundeinheiten („Building Blocks“) von Huminstoffen, die entweder bei Neubildung (z. B. bei Abwässern) oder bei Hydrolyse (Alterung) entstehen. Building Blocks sind dann als Zwischenstufe der Oxidation von Huminstoffen zu niedermolekularen Säuren aufzufassen. Molmassen im Bereich 300-450 g/mol.

BOM = Biogenic Organic Matter:

Biopolymers (Polysaccharide, Polypeptide und Proteine): Diese Fraktion ist sehr hochmolekular (20.000 bis 2 Mio g/mol), hydrophil und i.d.R. nicht UV-aktiv. Biopolymere sind nur in Oberflächenwässern vorhanden. Ausn aufbereitungstechnischer Sicht ist diese Fraktion besonders problematisch (Bioverfügbarkeit, Foulingpotenzial).

LMW Organic Acids: Summarische Fraktion für alle niedermolekularen, aliphatischen organischen Säuren. Die Säuren eluieren alle gleichzeitig aufgrund eines ionenchromatographischen Effekts. Ein Teil der Huminstoffe wird jedoch miterfasst und wird herausgerechnet. Daher ist es möglich, dass trotz sichtbarem „acid-peak“ keine niedermolekularen, aliphatischen Säuren vorliegen.

LMW-Neutrals: Der Theorie nach erscheinen hier nur noch niedermolekulare Stoffe, die i. d. R. neutral oder nur schwach anionisch sind (z.B. Alkohole, Aldehyde, Ketone, Aminosäuren). Zunehmende Retentionszeit weist auf zunehmende Hydrophobizität hin („amphiphil“ bis „hydrophob“, z. B. Pentanol bei 120 min, Oktanol bei 240 min).

SOM = Specific Organic Matter:

Prinzipiell können alle wasserlöslichen organischen Stoffe erfasst und im Vergleich mit einer Referenz auch identifiziert werden, sofern das Stoffgemisch nicht zu komplex ist, da die SEC-Methode keine sehr hohe Trennleistung hat. Typische Vertreter sind z.B. anionische Flockungshilfsmittel, Antiscalants, org. Konditionierungsmittel (z.B. Amine), allg. Additive, Harzauswaschungen (Polysulfonate, Trimethylamin). Nicht erfasst werden schwerlösliche Stoffe (z.B. PAK, Pestizide), sowie langkettige Tenside. Diese Stoffe würden in der HOC-Fraktion summarisch erfasst werden.

Inorganic Colloids (nur in UV-Chromatogrammen sichtbar): In dieser Fraktion erscheinen durch Lichtstreuung Kolloide wie Oxidhydrate von Fe, Al und Si oder auch kolloidaler Schwefel.

SUVA (SAC/DOC): Verhältnis von Gesamt-UV-Absorption und DOC: dieser Parameter ist in den USA weit verbreitet.



Results

LMW = low-molecular weight

DON = Dissolved organic nitrogen

n.q. = not quantifiable (< 1ppb; signal-to-noise ratio)

n.m. = not measured

*: Grey colour in HOC: Significance unclear

** : under the presumption that all org. N in the BIOpolymer fraction originates from proteins

** : pale green: cross sensitivity inferred

Tabelle 1

Project:	DOC			NOM												inorg. Colloid. SAC	SUVA (SAC/DOC)	
	Dissolved	Hydrophob.	Hydrophil.	BIO-polymers	DON (Norg)	N/C	% Proteins in BIOpol.**	Humic Subst. (HS)	DON (Norg)	N/C	Aromaticity (SUVA-HS)	Mol.Weight (Mn)	Position in HS-diagram	Building Blocks	LMW Neutrals			LMW Acids
humintech_1	% DOC	% DOC	% DOC	% DOC	--	--	--	--	--	--	--	--	--	% DOC	% DOC	% DOC	m ⁻¹	L/(mg*m)
Fulvosäure	105041	< 50	105041	124	119	0,96	n.q.	92609	1664	< 0,5	3,96	800	A	4372	7933	< 50	< 5	4,02
	100%	--	100,0%	0,1%	--	--	--	88,2%	--	--	--	--	--	4,2%	7,6%	--	--	--

Ergebnisse und Diskussion

Es liegt eine hochreine Fulvinsäure vor, die identisch ist mit Fulvinsäuren, die aus Braunwässern isoliert werden können.

Ende des Berichts.

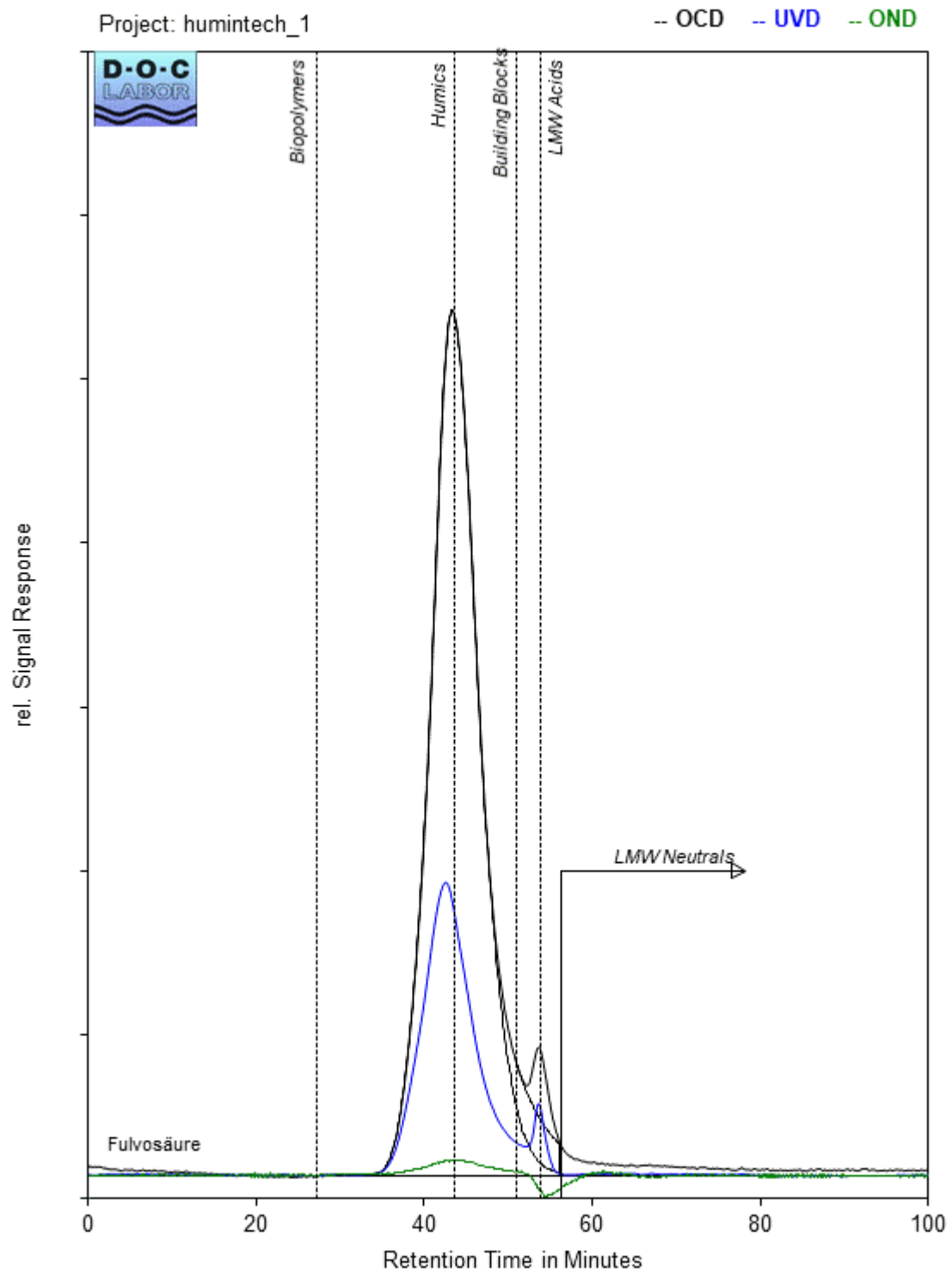


Abb. 1: LC-OCD Chromatogramme

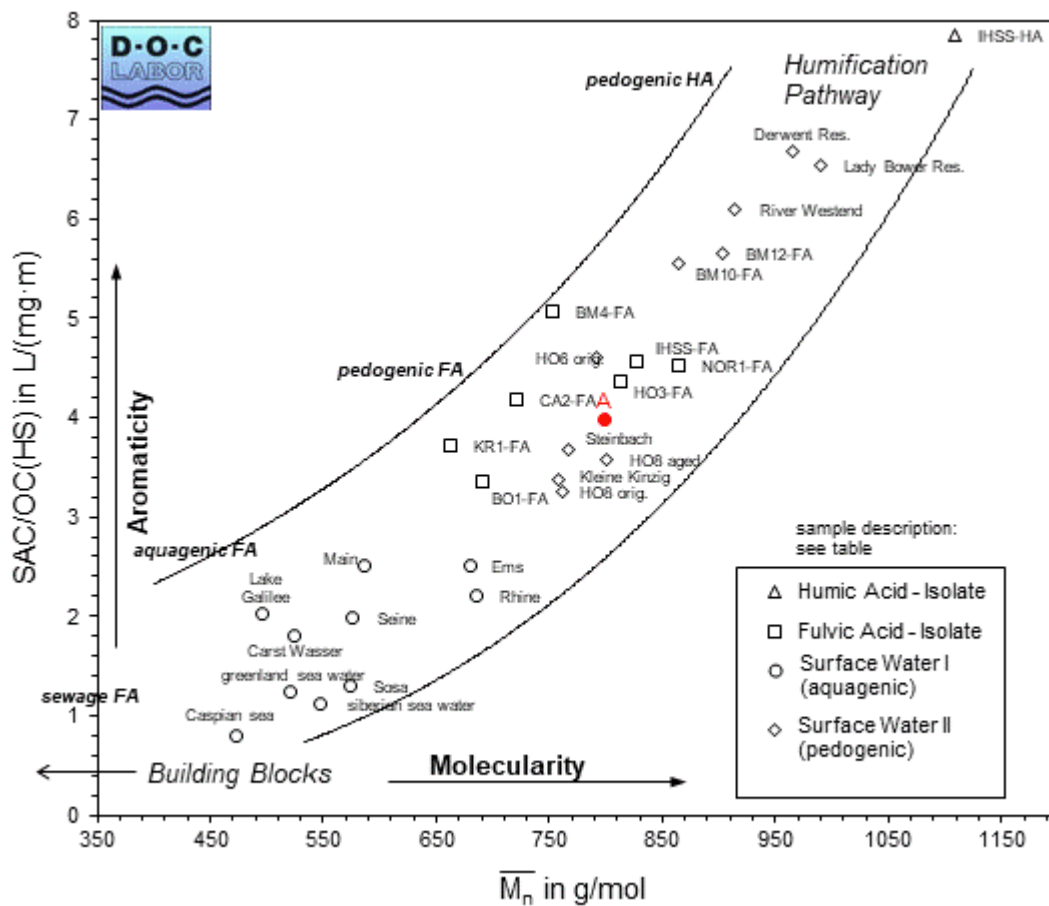


Abb. 2: Huminstoff-Diagramm